

ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI SENYAWA DOPAMIN DAN METIL KATEKOL SEBAGAI *DYE* UNTUK APLIKASI *DYE SENSITIZED SOLAR CELL* : “*SOFTWARE BENCHMARKING*”

Oleh

Bio Insan Akbar

NIM. 1209704009

Penelitian ini menganalisis sifat optik (absorpsi UV-Vis) dan sifat elektrokimia (perbedaan pita energi HOMO/LUMO) dari molekul zat warna organik dopamin dan metil katekol. Pengaruh penambahan *cluster* TiO₂ terhadap senyawa zat warna diamati, guna mendapatkan data pembandingan untuk melihat pengaruhnya terhadap performa senyawa zat warna. Optimasi dan penggambaran senyawa dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Avogadro, dilanjutkan memvisualisasikannya dengan bantuan perangkat lunak Chemcraft dan Gabedit. Perhitungan secara komputasi terhadap senyawa zat warna organik dopamin dan metil katekol dilakukan dengan menggunakan beberapa perangkat lunak, diantaranya adalah Firefly, dan Gaussian 03W dengan menggunakan metoda DFT (*Dependent Functional Theory*) dan TDDFT (*Time Dependent Density Functional Theory*). Perhitungan komputasi tersebut meliputi analisa sifat optik (absorpsi spektrum UV-Vis) dan sifat elektrokimia (*band gap* HOMO/LUMO). Data hasil perhitungan komputasi yang berupa sifat optik dan sifat elektrokimia terhadap kedua senyawa zat warna dapat melengkapi hasil penelitian Creutz *et al*, 2007. Dari hasil perhitungan secara komputasi, diketahui bahwa senyawa zat warna organik dopamin dan metil katekol berpotensi untuk digunakan dalam sistem sel surya tersensitasi zat warna. Hal ini ditunjukkan oleh kemampuan zat warna dalam mengabsorpsi cahaya pada panjang gelombang hingga 532,90 nm pada senyawa zat warna metil katekol yang terabsorpsi TiO₂ dan nilai perbedaan pita energi HOMO/LUMO yang lebih kecil sebesar 0,123 eV.

Kata Kunci : studi komputasi, zat warna organik, dopamin, metil katekol, DSSC.

ABSTRACT

COMPUTATION STUDY OF COMPOUNDS DOPAMINE AND METHYL CATECHOL AS A DYE FOR DYE SENSITIZED SOLAR CELL APPLICATION : “SOFTWARE BENCHMARKING”

By

Bio Insan Akbar

NIM. 1209704009

This study analyzed the optical properties (UV-Vis absorption) and electrochemical properties (band gap HOMO / LUMO) from organic dye molecules dopamine and methyl catechol. The effect in addition cluster of TiO₂ on dye compounds, it's observed in order to obtain comparable data to look out the impact on performance of dye compounds. Optimization and visualization of compounds are performed by using Avogadro's software, followed by visualized with helping software of Gabedit and Chemcraft. Computational calculation for organic dye compound of dopamine and metyl catechol were done by using some softwares, such as Firefly, and Gaussian 03W with using DFT (Dependent Functional Theory) and TDDFT (Time Dependent Density Functional Theory) methods. These computational calculations include analysis of the optical properties (spectra of UV-Vis absorption) and electrochemical properties (band gap HOMO / LUMO). The result data by computational calculations, these like optical properties and electrochemical properties for the two dye compounds could be complete theresearch of Creutz et al, 2007. The result based on computational computation, it is known that organic dye compounds about methyl catechol and dopamine arepotential for use in dye-sensitized solar cell system. This is evidenced by the ability of dye in absorption of light at wavelengths up to 532,90 nm in the dye methyl catechol compounds are absorbed by TiO₂ and the value of the band gap of HOMO / LUMO are small relatively by 0,123 eV.

Keywords : computational study, organic dye, dopamine, methyl catechol, DSSC.